

Численный расчет температурных зависимостей фотопроводимости $a\text{-Si:H}$ p -типа

© С.В. Кузнецов[¶]

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова (физический факультет),
119899 Москва, Россия

(Получена 19 октября 2000 г. Принята к печати 25 января 2001 г.)

Представлены результаты численного расчета температурных зависимостей фотопроводимости $a\text{-Si:H}$ p -типа. Расчеты были выполнены для простой рекомбинационной модели, учитывающей при низких температурах туннельную рекомбинацию между электронами, захваченными на состояния хвоста зоны проводимости, и дырками, захваченными на состояния хвоста валентной зоны. Результаты расчета согласуются с экспериментальными данными, согласно которым фотопроводимость $a\text{-Si:H}$ p -типа слабо зависит от положения уровня Ферми и от полной концентрации оборванных связей. Проведенное компьютерное моделирование позволяет заключить, что возможной причиной такой слабой зависимости является разная "протяженность" хвостов валентной зоны и зоны проводимости. Показано, что в $a\text{-Si:H}$ p -типа в условиях освещения статистика заполнения состояний в щели подвижности существенно отличается от равновесной.

1. Введение

Исследование температурных зависимостей фотопроводимости (ТЗФ) $a\text{-Si:H}$ позволяет глубже понять рекомбинационные процессы в этом неупорядоченном полупроводнике. Все исследователи единодушны в том, что при высоких температурах основным рекомбинационным каналом является рекомбинация свободных носителей через оборванные связи (D -центры) [1–3]. Однако, несмотря на большое количество работ, посвященных свойствам $a\text{-Si:H}$, до сих пор остается открытым вопрос определения основных каналов рекомбинации при средних и низких температурах. В основном для интерпретации ТЗФ в этой температурной области привлекаются следующие модели рекомбинации:

1) "зона–хвост" [4–6], в которой рекомбинация происходит путем захвата неравновесного носителя из свободной зоны на состояние хвоста противоположной зоны, захватившее перед этим носитель другого знака. При этом количество состояний хвоста, действующих как рекомбинационные центры, увеличивается по мере расхождения квазиуровней Ферми с уменьшением температуры;

2) "хвост–оборванная связь" [7,8], т. е. туннелирование захваченных на состояния хвостов зон носителей на состояния оборванных связей;

3) "хвост–хвост" [9,10], т. е. туннельная рекомбинация между электронами, захваченными на состояния хвоста зоны проводимости, и дырками, захваченными на состояния хвоста валентной зоны.

Каждая из этих моделей объясняет некоторые экспериментальные результаты, но не все. Например, ТЗФ, рассчитанные для модели "зона–хвост" при положении уровня Ферми E_F вблизи середины щели подвижности, демонстрируют температурное гашение фотопроводимости (ТГФ), что согласуется с экспериментальными данными. Однако расчетный наклон активационного

участка ТЗФ при низких температурах в 2 раза меньше по сравнению с экспериментальным значением. Напротив, модель "хвост–оборванная связь" воспроизводит этот наклон, но не обеспечивает проявление эффекта ТГФ [11]. Следует заметить, что роль рекомбинации "хвост–оборванная связь", очевидно, возрастает с увеличением концентрации D -центров. Для пленок $a\text{-Si:H}$ с низким содержанием дефектов необходимо учитывать рекомбинацию "хвост–хвост" [10,12]. Анализируя ограниченность применения указанных моделей, можно заключить, что в действительности нужно учитывать все возможные механизмы рекомбинации и выделять из них основной в зависимости от особенностей спектра состояний в щели подвижности (тип и концентрация дефектов и т. д.) и условий проведения измерений (температура, интенсивность света и т. д.). Как правило, и экспериментальные исследования, и численные расчеты посвящены нелегированному $a\text{-Si:H}$ и $a\text{-Si:H}$ n -типа. Фотопроводимость $a\text{-Si:H}$ p -типа исследована гораздо меньше. Наши экспериментальные результаты [11] показали, что фотопроводимость пленок $a\text{-Si:H}$, легированных бором, слабо зависит от уровня легирования и концентрации D -центров в области средних температур. Эти результаты позволяют предложить модель рекомбинации в $a\text{-Si:H}$, которая объясняет природу различий между процессами рекомбинации в $a\text{-Si:H}$ n - и p -типа разной протяженностью хвостов валентной зоны и зоны проводимости. Согласно этой модели, освещение пленок $a\text{-Si:H}$ p -типа приводит к существенному изменению заполнения состояний в щели подвижности. При этом концентрация D^0 -центров равна концентрации дырок, захваченных на состояния хвоста валентной зоны, и не зависит от положения уровня Ферми. Предполагается, что фотопроводимость на активационном участке ТЗФ $a\text{-Si:H}$ p -типа определяется прямым захватом дырок на D^0 -центры. Для верификации этой модели рекомбинации проведен численный расчет ТЗФ для $a\text{-Si:H}$ p -типа.

[¶] E-mail: sergkuz@mail.ru
Fax: (095) 9390159

2. Модель

Расчеты выполнены для упрощенной модели плотности состояний (ПС) в щели подвижности, состоящей из четырех дискретных уровней (рис. 1): E_{ip} , E_D , $E_D + U$ и E_{in} . Уровни E_{ip} и E_{in} с плотностью состояний N_{ip} и N_{in} — эффективные уровни хвоста валентной зоны и зоны проводимости соответственно. Уровни E_D и $E_D + U$ — энергетические уровни положительно коррелированных состояний оборванных связей. Как правило, состояния хвостов зон можно рассматривать в качестве мелких ловушек, находящихся в термодинамическом равновесии с ближайшей зоной. Для уровней E_{ip} и E_{in} в дальнейшем будут использоваться термины "ловушки для дырок" и "ловушки для электронов" соответственно. Такое упрощенное представление ПС в щели подвижности, как показано в работе [2], не приводит к качественным изменениям результатов численного расчета. Кроме того, введение простой модели ПС уменьшает количество параметров, используемых в расчетах, что позволяет более наглядно определить роль каждого параметра. На рис. 1 показаны рекомбинационные и эмиссионные потоки, которые учитывались при расчетах. В настоящей работе были рассмотрены два возможных канала рекомбинации: прямой захват свободных электронов и дырок на D -центры (потоки U_1 , U_2 , U_5 и U_6) и туннельная рекомбинация между электронами, захваченными на состояния хвоста зоны проводимости, и дырками, захваченными на состояния хвоста валентной зоны (U_{13}). Для неравновесного стационарного состояния можно записать следующие кинетические уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{dn}{dt} &= G - U_1 - U_2 + U_3 + U_4 - U_9 + U_{10} = 0, \\ \frac{dp}{dt} &= G - U_5 - U_6 + U_7 + U_8 - U_{11} + U_{12} = 0, \\ \frac{dn_t}{dt} &= U_9 - U_{10} - U_{13} = 0, \\ \frac{dp_t}{dt} &= U_{11} - U_{12} - U_{13} = 0, \\ \frac{d[N_D f^+]}{dt} &= U_3 + U_5 - U_1 - U_7 = 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Связь между потоками и концентрациями носителей и рекомбинационных центров записывается на основе формализма Шокли–Рида [2,14]:

$$\begin{aligned} U_1 &= nN_D f^+ c_n^+, \quad U_5 = N_D f^0 p c_p^0, \quad U_9 = nN_{in}(1 - f_{in})c_n, \\ U_2 &= nN_D f^0 c_n^0, \quad U_6 = N_D f^- p c_p^-, \quad U_{10} = N_{in} f_{in} e_{in}, \\ U_3 &= N_D f^0 e_n^0, \quad U_7 = N_D f^+ e_p^+, \quad U_{11} = pN_{ip} f_{ip} c_p, \\ U_4 &= N_D f^- e_n^-, \quad U_8 = N_D f^0 e_p^0, \quad U_{12} = N_{ip}(1 - f_{ip})e_{ip}. \end{aligned} \quad (2)$$

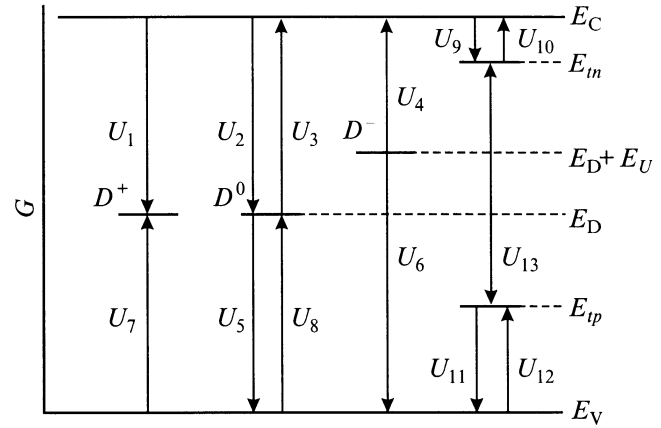


Рис. 1. Схематическое представление электронных переходов для упрощенной модели плотности состояний в щели подвижности.

Здесь и далее используются следующие обозначения: f^+ , f^0 и f^- — вероятности нахождения D -центра в D^+ -, D^0 - и D^- -состоянии соответственно; f_0^+ , f_0^0 и f_0^- — те же величины в тепловом равновесии; c_n^+ и c_n^0 — коэффициенты захвата электронов на D^+ - и D^0 -состояния; c_p^0 и c_p^- — коэффициенты захвата дырок на D^0 - и D^- -состояния; e_n^0 и e_n^- — коэффициенты теплового выброса электронов из D^0 - и D^- -состояний; e_p^+ и e_p^0 — коэффициенты теплового выброса дырок из D^+ - и D^0 -состояний; f_{in} и f_{ip} — вероятности заполнения ловушек для электронов и дырок соответственно; f_{in}^0 и f_{ip}^0 — те же величины в равновесии; c_{in} и c_{ip} — коэффициенты захвата электронов и дырок на соответствующие ловушки; e_{in} и e_{ip} — коэффициенты теплового выброса электронов из соответствующих ловушек; N_D — концентрация D -центров; G — темп оптической генерации. Полезно ввести обозначения: $n_t = N_{in} f_{in}$ и $p_t = N_{ip} f_{ip}$, где n_t и p_t — концентрации электронов и дырок, захваченных на соответствующие ловушки; n_{t0} и p_{t0} — те же величины в равновесных условиях. Отметим, что под терминами "равновесие" и "равновесные условия" мы понимаем состояние пленок α -Si:H в темноте, когда заполнение всех состояний определяется статистикой Ферми–Дирака. При наличии оптической генерации статистика заполнения состояний является неравновесной. В данной работе рассматриваются только стационарные неравновесные заполнения состояний в зонах и щели подвижности.

В соответствии с Данстеном [15] и работой [11] темп туннельной рекомбинации U_{13} может быть записан в виде

$$U_{13} = n_t p_t T_{np}, \quad (3)$$

где T_{np} — коэффициент туннельной рекомбинации "хвост–хвост". Используя принцип детального равновесия, можно получить выражения для коэффициентов эмиссии через коэффициенты захвата и вероятности заполнения f_0^+ , f_0^0 и f_0^- [2]. В свою очередь f_0^+ , f_0^0

и f_0^- определяются значениями E_F , E_D и U [16,17]. Так как D -центры могут находиться в трех зарядовых состояниях, можно записать очевидное равенство:

$$f^+ + f^0 + f^- = 1. \quad (4)$$

Условие электронейтральности пленок a -Si:H в темноте и при освещении может быть записано в виде [2,5]

$$\begin{aligned} n + N_{in}f_{in} + N_D f^- - n_0 - N_{in}f_{in}^0 - N_D f_0^- \\ = p + N_{ip}f_{ip} + N_D f^+ - p_0 - N_{ip}f_{ip}^0 - N_D f_0^+. \end{aligned} \quad (5)$$

Таким образом, для 7 неизвестных величин n , p , f_{in} , f_{ip} , f^+ , f_0^- и f_0^+ составлена система из 7 линейно независимых уравнений. Эта система уравнений может быть решена численным способом с помощью компьютера.

3. Выбор параметров

Для всех параметров, входящих в рассматриваемую теоретическую модель, были взяты наиболее распространенные в литературе значения [4,6,9]. Для эффективной плотности состояний зоны проводимости и валентной зоны было использовано значение 10^{21} см^{-3} . Значение щели подвижности было взято равным 1.8 эВ; подвижность — $10 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$ и $1 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$ для электронов и дырок соответственно. Положение уровня Ферми $E_F - E_V$ варьировалось между 0.4 и 1.6 эВ. Темп фотогенерации G принимался равным $10^{19} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$. Для параметров оборванных связей были использованы следующие значения

$$E_D = 0.9 \text{ эВ}, \quad U = 0.3 \text{ эВ},$$

$$c_n^0 = c_p^0 = 3 \cdot 10^{-15} \text{ см}^{-2}, \quad c_n^+ = c_p^- = 1.5 \cdot 10^{-13} \text{ см}^{-2}.$$

Значение N_D варьировалось в пределах от 10^{16} до $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Параметры эффективных ловушек в хвостах зон принимались равными

$$E_C - E_m = 0.1 \text{ эВ}, \quad E_{ip} - E_V = 0.3 \text{ эВ},$$

$$N_{in} = N_{ip} = 10^{19} \text{ см}^{-3}, \quad c_m = c_{ip} = 10^{-15} \text{ см}^{-3}.$$

4. Результаты численного расчета и их обсуждение

Используя численный метод решения системы уравнений (1), (4) и (5), мы получаем температурные зависимости 7 величин: n , p , f_{in} , f_{ip} , f^+ , f_0^- и f_0^+ . Прежде всего рассмотрим зависимость величины фотопроводимости

$$\sigma_{ph} = e\mu_n n + e\mu_p p$$

от положения уровня Ферми, представленную на рис. 2. На этом рисунке приведена также зависимость темновой проводимости (σ_d) от положения уровня Ферми. Значения σ_{ph} и σ_d рассчитаны для $T = 250 \text{ К}$ и $N_D = 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Это значение температуры, согласно

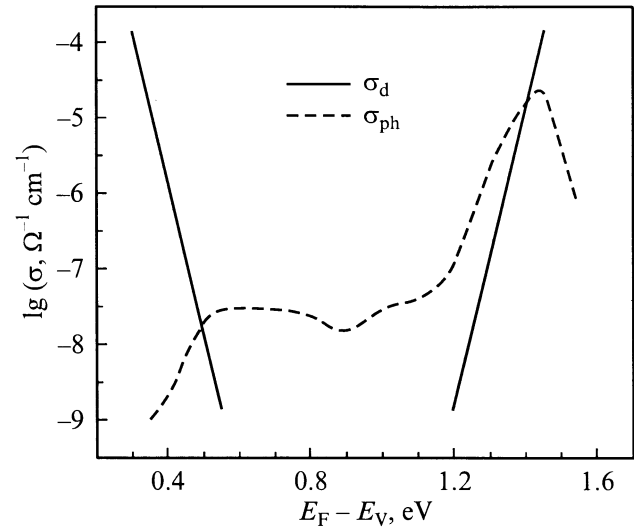


Рис. 2. Зависимости темновой проводимости (σ_d) и фотопроводимости (σ_{ph}) от положения уровня Ферми $E_F - E_V$.

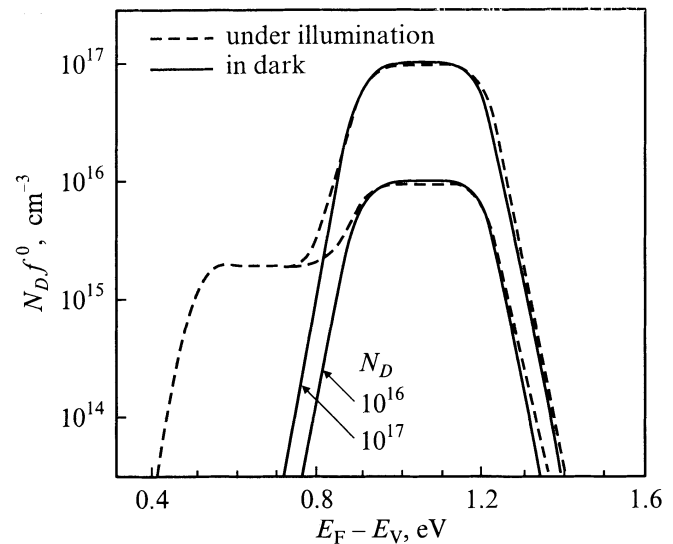


Рис. 3. Зависимости концентрации D^0 -центров ($N_D f^0$) от $E_F - E_V$ в темноте (сплошные линии) и в условиях освещения (пунктирные линии). Значения N_D , принятые при расчете, указаны на рисунке в см^{-3} .

экспериментальным данным [13], лучше подходит, чем $T = 300 \text{ К}$, для исследований в так называемом режиме "промежуточных" (средних) температур, в котором фотопроводимость растет экспоненциально с температурой [9,13]. Согласно рис. 2, зависимость σ_{ph} от величины $E_F - E_V$ сильно асимметрична в отличие от зависимости σ_d ($E_F - E_V$). При этом σ_{ph} не зависит от уровня Ферми в интервале $E_F - E_V = 0.5 - 0.75 \text{ эВ}$, что соответствует a -Si:H p -типа со слабым и средним уровнем легирования. В отличие от a -Si:H p -типа, в a -Si:H n -типа увеличение легирования вызывает рост σ_{ph} при $E_F - E_V = 1.15 - 1.45 \text{ эВ}$. Однако сильное легирование

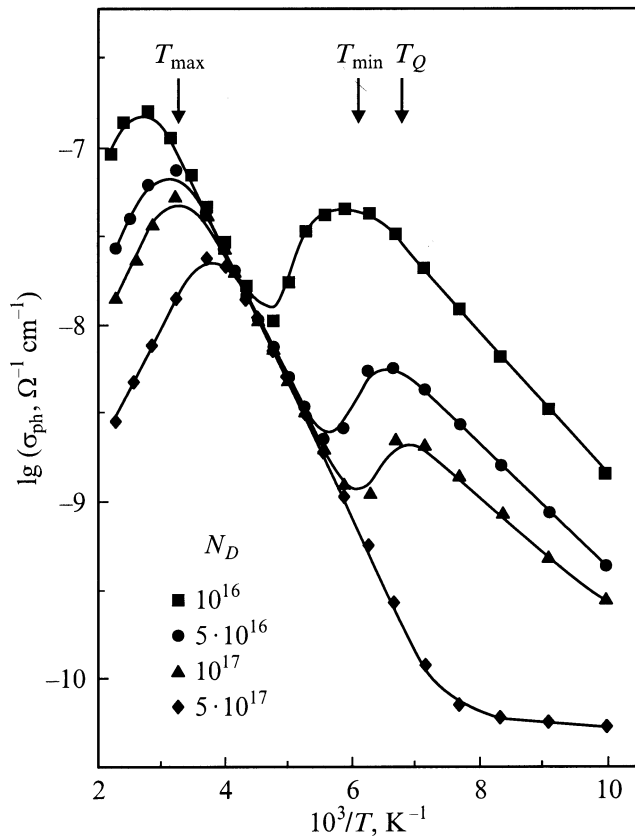


Рис. 4. Температурные зависимости фотопроводимости при значении $E_F - E_V = 0.75$ эВ и разных величинах N_D , указанных на рисунке в см^{-3} . Стрелками отмечены характерные температуры зависимости $\sigma_{\text{ph}}(1/T)$ для $N_D = 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

в обоих случаях приводит к уменьшению фотопроводимости. Заметим, что рассчитанная зависимость σ_{ph} от $(E_F - E_V)$ находится в согласии с экспериментальными результатами [13,17,18].

Так как в *a*-Si:H *p*-типа основными рекомбинационными состояниями для дырок являются D^0 -центры, особый интерес представляет зависимость $N_D f^0$ от $E_F - E_V$. На рис. 3 построены такие зависимости, рассчитанные для двух значений N_D при $T = 250$ К. Как видно из рис. 3, при освещении эти зависимости носят ярко выраженный асимметричный характер и демонстрируют три важные особенности для интервала $E_F - E_V = 0.5 - 0.75$ эВ:

- 1) неравновесная концентрация D^0 -центров $N_D f^0$ существенно отличается от равновесной;
- 2) $N_D f^0$ не зависит от величины N_D ;
- 3) $N_D f^0$ не зависит от $E_F - E_V$.

Перечисленные особенности справедливы для области средних ("промежуточных") температур.

Чтобы рассмотреть влияние температуры и величины N_D на σ_{ph} , на рис. 4 приведены ТЗФ для $E_F - E_V = 0.75$ эВ, рассчитанные для разных значений N_D . Температурные границы между характерными температурными режимами ТЗФ для $N_D = 10^{17} \text{ см}^{-3}$

обозначены через T_{max} , T_Q и T_{min} . Как видно из рисунка, все зависимости $\sigma_{\text{ph}}(1/T)$ совпадают при средних температурах, где σ_{ph} носит активационный характер с энергией активации $E_{A1} = 0.15$ эВ, что равно половине энергетического положения ловушек для дырок $0.5(E_{lp} - E_V)$. Кроме того, в этом интервале температур σ_{ph} не зависит от N_D . Напротив, при высоких и низких температурах фотопроводимость приблизительно обратно пропорциональна N_D . Для $N_D \leq 10^{17} \text{ см}^{-3}$ рассчитанные зависимости $\sigma_{\text{ph}}(1/T)$ демонстрируют эффект ТГФ. Энергия активации $\sigma_{\text{ph}}(1/T)$ при низких температурах $T < T_Q$ составляет $E_{A2} = 0.08 - 0.09$ эВ, что близко к значению $E_C - E_m = 0.1$ эВ. Общерицно связывать значение E_{A2} с положением эффективного уровня ловушек для электронов [7,9]. В основе этого лежат два предположения: при низких T в нелегированном *a*-Si:H и *a*-Si:H *p*-типа, во-первых, зона проводимости находится в тепловом равновесии с ловушками для электронов:

$$n = n_t(N_C/N_m) \exp[(E_m - E_C)/kT],$$

и, во-вторых, туннельная рекомбинация является доминирующей (т.е. n_t не зависит от температуры).

Численный расчет темпов рекомбинации "зона- D -центр" (R_D) и "хвост-хвост" (R_t) подтверждает, что $R_t > R_D$ при $T < T_Q$ (рис. 5). Как видно из рис. 5, низкотемпературный максимум фотопроводимости со-

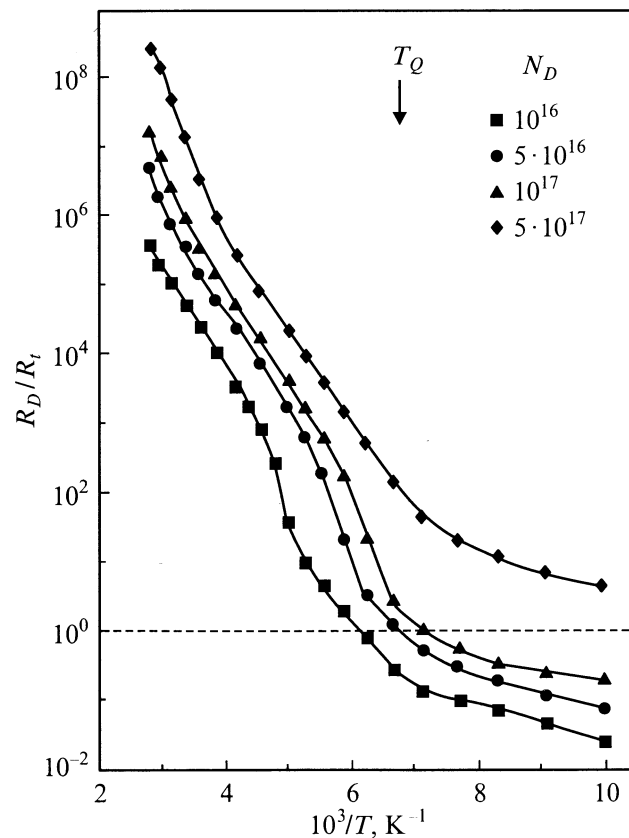


Рис. 5. Температурная зависимость отношения R_D/R_t для $E_F - E_V = 0.75$ эВ и разных N_D , указанных на рисунке в см^{-3} .

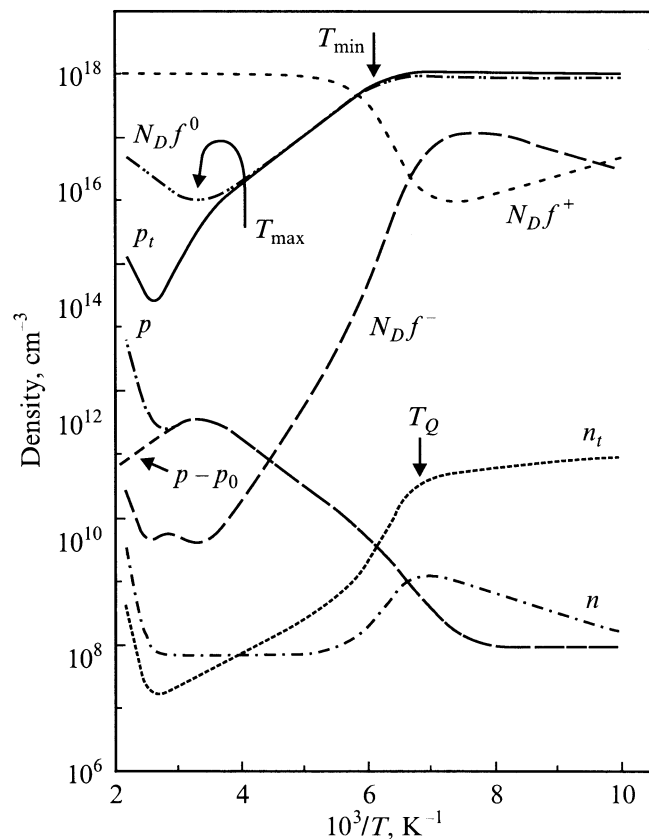


Рис. 6. Температурные зависимости концентраций D^+ -, D^0 - и D^- -состояний, а также свободных носителей (n , p) и носителей, локализованных на ловушках (n_t , p_t) для $N_D = 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Отмечены характерные температуры T_{\max} , T_{\min} и T_Q .

ответствует смене типа рекомбинации. При средних температурах $R_D \gg R_t$, и, следовательно, в $a\text{-Si:H}$ p -типа рекомбинация свободных носителей на D -центрах определяет активационный характер ТЗФ.

Для более детального анализа ТЗФ, показанных на рис. 4, воспользуемся рис. 6, на котором представлены температурные зависимости 7 величин, соответствующих расчету при $N_D = 10^{17} \text{ см}^{-3}$. В соответствии с рис. 6 при средних температурах $p_t = N_D f^0$. Это соотношение дает ключ к пониманию характера ТЗФ в $a\text{-Si:H}$ p -типа. Как было показано ранее [13], оно может быть получено из условия электронейтральности для $a\text{-Si:H}$ p -типа, как следствие большей протяженности хвоста валентной зоны по сравнению с хвостом зоны проводимости. С одной стороны, это соотношение означает, что в $a\text{-Si:H}$ p -типа при средних и низких температурах неравновесный положительный заряд локализован в хвосте валентной зоны, а неравновесный отрицательный заряд — на оборванных связях. С другой стороны, из соотношения $p_t = N_D f^0$ следует, что $N_D f^0$ определяется только значением p_t , которое в свою очередь определяется параметрами E_{tp} и N_{tp} (одним и тем же значениям E_{tp} и N_{tp} соответствуют одни и те

же p_t и $N_D f^0$). Предполагая в качестве основного канала рекомбинации переходы зона- D -центр, мы приходим к независимости σ_{ph} от $E_F - E_V$ и N_D , которая была обнаружена экспериментально [13]. Как видно на рис. 6, высокотемпературный максимум фотопроводимости соответствует минимуму $N_D f^0$, а уменьшение σ_{ph} при $T > T_{\max}$ связано с увеличением $N_D f^0$, в соответствии с равновесной статистикой. Согласно рис. 4, увеличение N_D будет приводить к уменьшению максимумов σ_{ph} при $T = T_{\max}$ и $T = T_Q$ и их смещению в сторону низких температур. Однако при средних температурах σ_{ph} не зависит от N_D . Это согласуется с экспериментальными результатами о влиянии предварительного освещения на ТЗФ [13].

5. Заключение

Таким образом, проведенный численный расчет температурной зависимости фотопроводимости (ТЗФ) показал, что в $a\text{-Si:H}$ p -типа: 1) фотопроводимость не зависит от уровня легирования и концентрации дефектов в достаточно широком интервале их изменений, 2) заполнение D -центров существенно отличается от равновесного, 3) активационный характер ТЗФ при промежуточных температурах не связан с туннельной рекомбинацией.

Полученные результаты позволяют заключить, что независимость фотопроводимости $a\text{-Si:H}$ p -типа от уровня легирования и от концентрации оборванных связей является имманентным свойством этого материала, порожденным разной "протяженностью" хвостов зон и асимметрией D^0 - и D^- -состояний относительно середины щели подвижности.

Автор выражает глубокую признательность А.Г. Казанскому за неизменно полезные дискуссии.

Список литературы

- [1] M. Hoheisel, W. Fuhs. *Phil. Mag. B*, **57**, 411 (1988).
- [2] F. Vaillant, D. Jousse. *Phys. Rev. B*, **34**, 4088 (1986).
- [3] E. Morgado. *Phil. Mag. B*, **63**, 529 (1991).
- [4] T.J. McMahon, J.P. Xi. *Phys. Rev. B*, **34**, 2475 (1986).
- [5] E. Morgado. *Mater. Res. Symp. Proc.*, **336**, 419 (1994).
- [6] F. Vaillant, D. Jousse, J.-C. Bruyere. *Phil. Mag. B*, **57**, 649 (1988).
- [7] A. Vomvas, H. Fritzsche. *J. Non-Cryst. Sol.*, **97&98**, 823 (1987).
- [8] W. Fuhs. *J. Non-Cryst. Sol.*, **77&78**, 593 (1985).
- [9] J.-H. Zhou, S.R. Elliott. *Phys. Rev. B*, **48**, 1505 (1993).
- [10] R.A. Street. In: *Semiconductors and Semimetals*, v. 21, pt. B, p. 197.
- [11] B. Cleve, P. Thomas. *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **192**, 317 (1990).
- [12] R.A. Street, J.C. Knight, D.K. Biegelsen. *Phys. Rev. B*, **18**, 1880 (1978).
- [13] С.В. Кузнецов. *ФТП*. **34**, 748 (2000).
- [14] W. Shockley, W.T. Read. *Phys. Rev.*, **87**, 835 (1952).
- [15] D. Dunstan. *Phil. Mag. B*, **46**, 579 (1982).

[16] H. Okamoto, Y. Hamakawa. Sol. St. Commun., **24**, 23 (1977).

[17] P.E. Vanier. Solar. Cells, **9**, 85 (1983).

[18] А.Г. Казанский. ФТП, **24**, 915 (1990).

Редактор Т.А. Полянская

Numerical calculations of the temperature dependencies of photoconductivity in p -type α -Si:H

S.V. Kuznetsov

Moscow State University,
119899 Moscow, Russia

Abstract Calculated results for temperature dependencies of photoconductivity in p -type α -Si:H are reported. Simulation was performed for a simple recombination model, taking into account at low temperatures tunneling between trapped electrons in the conductance-band-tail and trapped holes in valence-band-tail. Calculation are in agreement with recent experimental data that the photoconductivity in p -type α -Si:H depends weakly on Fermi level position and total concentration of dangling bonds. According to calculations, this slight dependence results probably from different "widths" of valence-band- and conduction-band-tail. As is shown, in p -type α -Si:H under illumination the occupation statistics for states in gap differs essentially from the equilibrium one.